

COMPARATIVE ANALYSIS OF NUMERICAL SCHEMES APPLIED TO THE DAM BREAK PROBLEM

Cantero Chinchilla, Francisco Nicolás; Castro Orgaz, Oscar; Ayuso Muñoz, José Luis

Universidad de Córdoba

Traditional numerical schemes are frequently used in computing hydrodynamic models for simple problems. In general, the numerical results converge to the solution without significant errors. The particular case of a dam break provokes discontinuities in the solution which can not be approximated by the traditional methods properly. Therefore, high-order accuracy numerical schemes are required. This paper conducts a comparative analysis of explicit and implicit numerical schemes using finite difference discretization and the "shock-capturing methods", higher order methods based on finite volumes. The adjustment results to the analytical solution, represented by the RMS against variables such as the Courant number and computational time-cost, allow to distinguish between the most efficient and effective schemes. This being so, it follows that the methods based on finite volumes discretization reach a higher degree of fit of the analytical solution and a better balanced state between the RMS and the computational time-cost.

Keywords: *Saint-Venant equations; Numerical schemes; Finite volume method; Dam-break flow*

ANÁLISIS COMPARATIVO DE ESQUEMAS NUMÉRICOS APLICADOS AL CASO DE LA ROTURA DE PRESA

El uso de esquemas numéricos tradicionales explícitos e implícitos para la resolución de modelos hidrodinámicos es frecuente en problemas sencillos. En la mayoría de los casos, cuando las soluciones son suaves, los métodos convergen a la solución sin errores significativos. El caso particular de la rotura de presa presenta discontinuidades en la solución que hacen que no todos los métodos sean capaces de aproximarlas correctamente. Como consecuencia, se requieren métodos de mayor grado de ajuste de la solución. En este trabajo se lleva a cabo un análisis comparativo de métodos numéricos explícitos e implícitos de discretización mediante diferencias finitas y los "shock-capturing methods", de orden superior, basados en la discretización mediante volúmenes finitos. Los resultados del ajuste a la solución analítica del caso ideal de la rotura de presa, representados mediante el RMS en función de otras variables como el número de Courant y el tiempo-coste computacional, permiten discernir entre los métodos más eficientes y eficaces. Siendo así, se deduce que los métodos basados en la discretización mediante volúmenes finitos alcanzan un mayor grado de ajuste de la solución analítica y un mejor equilibrio entre el RMS y el tiempo-coste computacional.

Palabras clave: *Ecuaciones Saint-Venant; Esquemas numéricos; Volúmenes finitos; Rotura de presa*

1. Introducción

Los modelos hidrodinámicos de flujo generalmente se resuelven empleado esquemas numéricos implícitos y explícitos convencionales. Sin embargo, el problema de la rotura de presa constituye un caso especial en la resolución de estos modelos. La discontinuidad de su solución inicial hace que el comportamiento de los modelos numéricos tradicionales no se correcto a la hora de aproximar la solución en cualquier estado de tiempo. Además, la aplicación de estos produce un error residual que a la larga puede repercutir en graves aberraciones sobre la solución o incluso en el fallo de los programas. En este sentido, y para una correcta aplicación, se han elaborado modificaciones de los esquemas numéricos implícitos y explícitos tradicionales, así como se han buscado alternativas más fiables de orden superior como los “shock-capturing methods”.

La mayoría de los esquemas numéricos que se utilizan para este fin tienen su origen en la discretización por diferencias finitas de la forma conservativa de las ecuaciones. Lax (1954) constituye uno de los métodos de diferencias finitas (DF) de más simple programación y produce resultados aceptables para aplicaciones típicas (Chaudhry, 1987). El esquema explícito propuesto por MacCormack es un método de doble paso (predictor-corrector) de segundo grado de ajuste, tanto en espacio como en tiempo, y es capaz de captar las discontinuidades en la solución sin necesidad de aislarlas (MacCormack, 1969; Anderson et al., 1984). En cuanto a los esquemas numéricos implícitos, uno de los más comunes es el propuesto por Preissmann (Preissmann & Cunge, 1961). Este método plantea un sistema de ecuaciones global para todo el mallado que se resuelve de forma conjunta a través de operaciones matriciales (Akan, 2006). Sin embargo, los “shock-capturing methods”, basados en la discretización mediante volúmenes finitos (VF), aproximan la solución en mejor grado para cualquier estado de tiempo (Toro, 2009). En función del modo de cálculo de los flujos en las interfaces de los volúmenes surgen diversos esquemas numéricos.

Este trabajo acomete un análisis comparativo entre métodos numéricos explícitos e implícitos y los “shock-capturing methods” para el caso ideal de la rotura de presa. Como esquemas numéricos se han implementado: Lax y MacCormack como explícitos en DF, Preissmann como implícitos en DF y Total Variation Diminishing (TVD) - Weighted Average Flux (WAF) como “shock-capturing method” en VF. Los resultados del ajuste a la solución analítica (Stoker, 1957) son representados mediante el error cuadrático medio (RMS) en función del número de Courant (Cn) y del coste computacional. El posterior análisis permite discernir cuál de los esquemas numéricos es más eficaz y eficiente sobre el caso de estudio.

2. Modelo hidrodinámico

El modelo hidrodinámico considerado en este trabajo coincide con las ecuaciones de Saint-Venant (Chaudhry, 2008). En forma conservativa las ecuaciones se pueden reorganizar en derivadas temporales del vector variables (U), derivadas espaciales del vector de flujos (F) y los términos fuente/sumidero (S) (Toro, 2009) tal que

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad (1)$$

donde

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} h \\ hu \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} hu \\ hu^2 + \frac{1}{2}gh^2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ -gh \left(\frac{\partial z}{\partial x} + S_f \right) \end{bmatrix} \quad (2)$$

en las que h es la altura del flujo de agua; u la velocidad promediada del flujo; g la aceleración de la gravedad; z la altura del fondo y S_f el término de fricción con el fondo.

Dado que lo que se busca es la comparación de las soluciones de la rotura de presa con la solución analítica (Stoker, 1957), las ecuaciones del modelo se aplican a condiciones ideales. Estas son:

- Lecho horizontal: las derivadas espaciales del fondo son nulas.
- Lecho liso: no existen términos de fricción en las ecuaciones.

De esta manera, los términos fuente de las ecuaciones de Saint-Venant para nuestro caso de aplicación quedan como

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

Por tanto, el sistema es

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

3. Esquemas numéricos

3.1 Esquemas numéricos explícitos

El primero de los esquemas numéricos explícitos considerados en este trabajo es el de Lax (1954). Se trata de un esquema difusivo basado en una discretización por diferencias finitas, en el que los términos fuente, así como el valor actual del vector variables (U), son aproximados mediante promedios espaciales. La forma general del esquema numérico para el modelo considerado aquí es

$$U_i^{k+1} = \frac{1}{2}(U_{i+1}^k + U_{i-1}^k) - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1}^k - F_{i-1}^k) \quad (5)$$

donde i, k son el subíndice espacial y el superíndice temporal respectivamente; Δx el espaciado de la malla y Δt el paso de tiempo.

El segundo esquema numérico explícito lo constituye MacCormack (1969). Debido a que ajusta en segundo orden la solución tanto para el espacio como para el tiempo, representa una mejora sustancial al método de Lax. Además, esta característica contribuye a que el esquema numérico sea capaz de capturar los choques sin necesidad de aislar la solución (Fennema and Chaudhry, 1987).

En el proceder de la discretización del predictor y el corrector caben dos posibilidades. La primera supone considerar diferencias finitas atrasadas para aproximar las derivadas espaciales en el predictor, y posteriormente utilizar esos valores en el corrector discretizando con diferencias finitas adelantadas los gradientes espaciales. Y viceversa en el segundo caso. Lo recomendable es utilizar las dos opciones de discretización alternándose en el tiempo.

Predictor

$$U_i^* = U_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_i^k - F_{i-1}^k) \quad (6)$$

Corrector

$$U_i^{**} = U_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1}^* - F_i^*) \quad (7)$$

Los superíndices * y ** hacen referencia al valor de las variables después del paso predictor y corrector respectivamente. Por tanto, la solución en el paso de tiempo siguiente se construye como

$$U_i^{k+1} = \frac{1}{2} (U_i^* + U_i^{**}) \quad (8)$$

Sin embargo, el esquema numérico de MacCormack deja unos errores numéricos disipativos que pueden ir amplificándose en estados de tiempo sucesivos. Estos errores desembocan en oscilaciones puramente numéricas de la solución. Para limitar estos errores se introduce el concepto de viscosidad artificial (Jameson et al., 1981). El valor de la viscosidad artificial en los nodos centrales de la malla se calcula como

$$v_i = \frac{|h_{i+1} - 2h_i + h_{i-1}|}{|h_{i+1}| - 2|h_i| + |h_{i-1}|}; \quad \varepsilon_{i+1/2} = \kappa \max(v_i, v_{i+1}) \quad (9)$$

donde κ es el factor de viscosidad artificial. Finalmente la solución de las variables f se ve afectada tal que

$$U_i^{k+1} = U_i^{k+1} + \varepsilon_{i+1/2} (U_{i+1}^{k+1} - U_i^{k+1}) + \varepsilon_{i-1/2} (U_i^{k+1} - U_{i-1}^{k+1}) \quad (10)$$

Nótese que la ecuación (8) calcula la viscosidad artificial para la altura de agua. De manera análoga se procede para el cálculo de la viscosidad artificial en la velocidad del flujo.

Por último, se presentan los esquemas numéricos explícitos que se basan en la discretización del mallado por volúmenes finitos. La resolución de los problemas tipo Riemann mediante volúmenes finitos llevan a soluciones de tipo Godunov que son capaces de capturar adecuadamente los choques en la solución (Toro, 2009). La forma general de estos esquemas numéricos sobre la ecuación (4) es

$$U_i^{k+1} = U_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) \quad (11)$$

donde el subíndice $i \pm 1/2$ hace referencia a los puntos medios entre el centro del volumen i y los puntos adyacentes $i \pm 1$. Los términos fuente no aparecen debido al carácter especial del modelo considerado aquí.

En este trabajo se implementa uno de los esquemas numéricos a la vanguardia en la resolución del problema tipo rotura de presa mediante volúmenes finitos. Se trata del método TVD-WAF, que calcula los flujos en los límites de cada volumen tal que

$$F_{i+1/2} = \frac{1}{2} (F_i + F_{i+1}) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \text{sgn}(c_j) A_j \Delta F_{i+1/2}^{(j)} \quad (12)$$

donde $c_j = S_j \Delta t / \Delta x$ es el número de Courant para cada velocidad de onda S_j ; A_j la función de limitación WAF; y $\Delta F_{i+1/2}^{(j)}$ el salto de flujo en la onda j . Aquí se utiliza un limitador de SuperBee, que es el menos difusivo de los limitadores existentes, y las soluciones Harten-Lax-VanLeer (HLL) del problema de Riemann para los saltos de flujo (Toro, 2009).

3.2 Esquemas numéricos implícitos

Este tipo de esquemas construyen la solución en el estado de tiempo siguiente a partir de la información de las variables en el estado de tiempo actual y en el siguiente. Por tanto, se trata de métodos iterativos. En este trabajo se considera el esquema propuesto por Preissmann (1961). La forma general del mismo para el modelo considerado aquí es

$$U_i^{k+1} + U_{i+1}^{k+1} + 2 \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\alpha (F_{i+1}^{k+1} - F_i^{k+1}) + (1 - \alpha) (F_{i+1}^k - F_i^k) \right] = U_i^k + U_{i+1}^k \quad (13)$$

en la que α es el coeficiente que balancea el esquema entre totalmente explícito ($\alpha=0$) o totalmente implícito ($\alpha=1$). El esquema de Preissmann es estable para un rango de $0.55 < \alpha < 1$.

Para la resolución de este esquema numérico se aplica Newton-Raphson, con el que se estiman valores para la solución inicial y se recalculan los valores de las soluciones intermedias hasta que el vector independiente B sea nulo o de un valor despreciable. La ecuación matricial es

$$Ax = B \quad (14)$$

donde B es el valor de la ecuación (12), x el vector de variables y A es una matriz de derivadas parciales de B con respecto a las variables h y u (Akan, 2006).

4. Caso de Estudio

Para estudiar el ajuste de la solución de cada uno de los esquemas numéricos expuestos, en el presente estudio se analiza un caso hipotético de rotura de presa (Tseng & Chu, 2000). La longitud del canal es de 2000 metros, la altura inicial aguas arriba es de 10 metros y la altura inicial aguas debajo de 5 metros. La discontinuidad de la solución en el

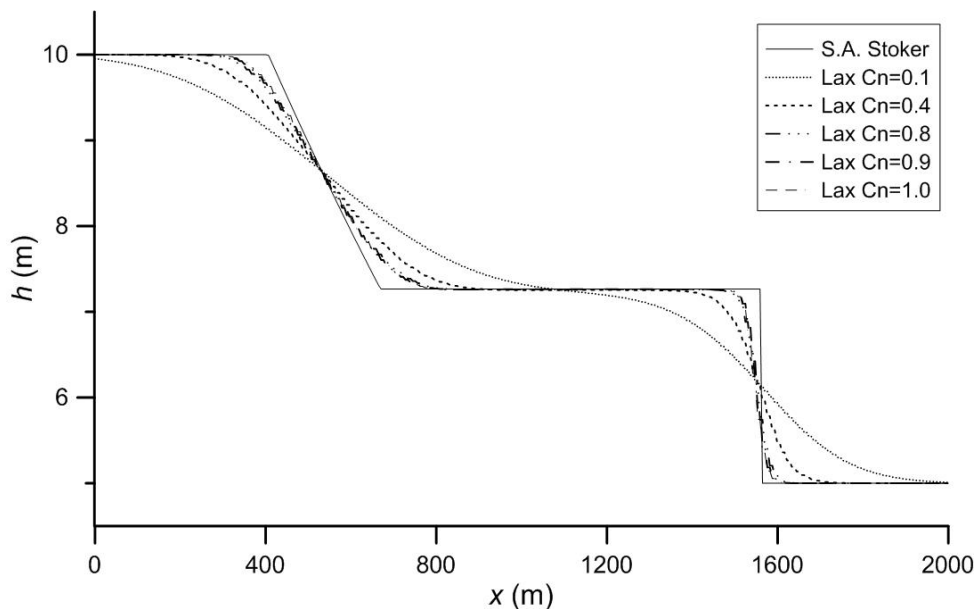
estado inicial se encuentra situada a una distancia de 1000 metros desde el origen. El estado de la solución transcurridos 60 s desde la rotura es el elegido para las comparativas.

Con el fin de encontrar un equilibrio entre una buena resolución espacial y un tiempo computacional aceptable, en este trabajo se elige un paso espacial tal que el número de divisiones del canal es de 350. El paso temporal se ajusta en cada paso en función de la condición de estabilidad de Courant-Friedrich-Levy (CFL) para un C_n dado, que se define como dato inicial al principio de cada programa.

5. Resultados

La figura 1 muestra el análisis comparativo del esquema numérico de Lax para diferentes condiciones de estabilidad. Variando los valores del número de Courant entre 0 y 1 se encuentra que la solución de este esquema es más o menos difusiva. En concreto, valores bajos del número de Courant arrojan resultados más difusivos y, por tanto, con un mayor error RMS sobre la solución analítica de Stoker.

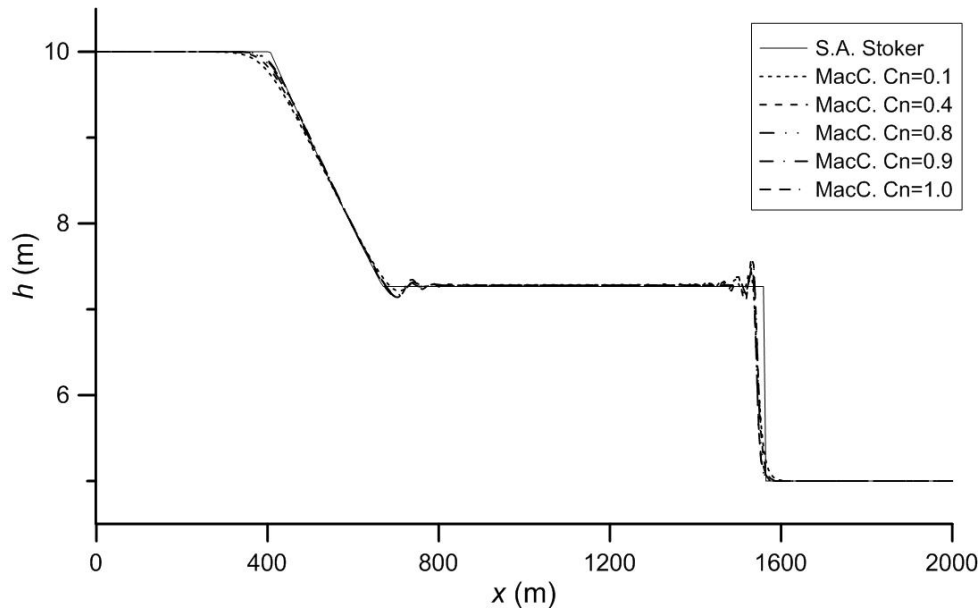
Figura 1: Efecto del número de Courant (C_n) sobre el esquema número de Lax



Se observa que para valores superiores a 0.8 los resultados apenas difieren y presentan un ajuste a la solución analítica aceptable, aunque en todo caso difusivo.

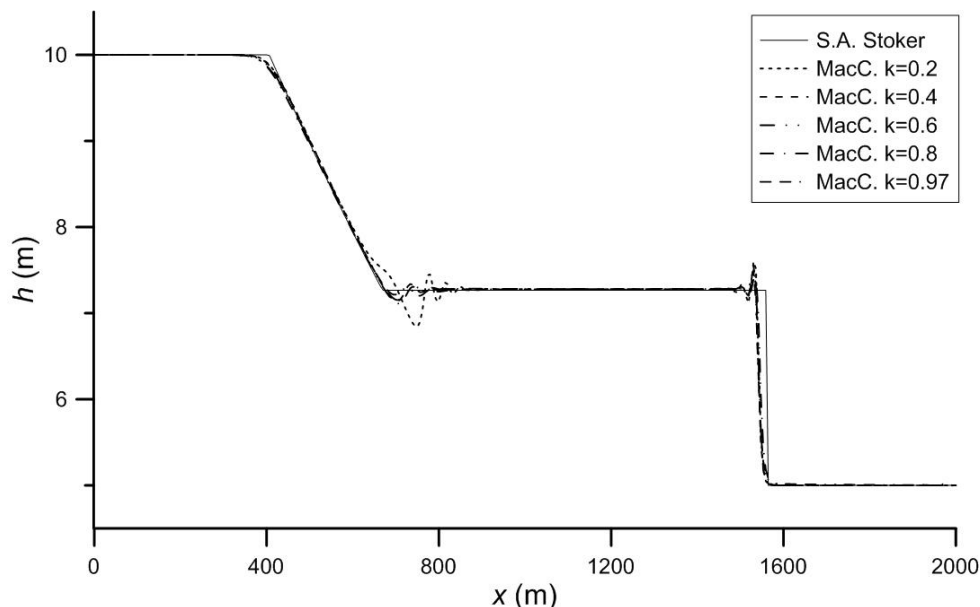
Análogamente, se realiza el mismo análisis para el esquema numérico de MacCormack. Para llevarlo a cabo es necesario definir un valor fijo para el factor de viscosidad artificial k . En este caso se toma un valor de $k=0.6$. La salida gráfica de los resultados los podemos encontrar en la figura 2. Se observa que en los cambios bruscos de pendiente en la solución aparecen oscilaciones de tipo puramente numérico. Pese al cambio de valor del parámetro C_n la solución se mantiene prácticamente inalterable, presentando por tanto un valor cuasi-constante del RMS con respecto a la solución analítica.

Figura 2: Efecto del número de Courant (Cn) sobre el esquema número de MacCormack



Fijando el valor del número de Courant se puede estudiar la influencia del factor de viscosidad artificial en la limitación de las oscilaciones numéricas. Así, haciendo $Cn=0.9$ se testan varios valores de k . En la figura 3 se observa que a valores próximos a la unidad las oscilaciones numéricas se suavizan, mientras que para valores bajos estas se acentúan. Sin embargo, en ningún caso se consiguen eliminar, siendo estas una característica remanente del esquema numérico.

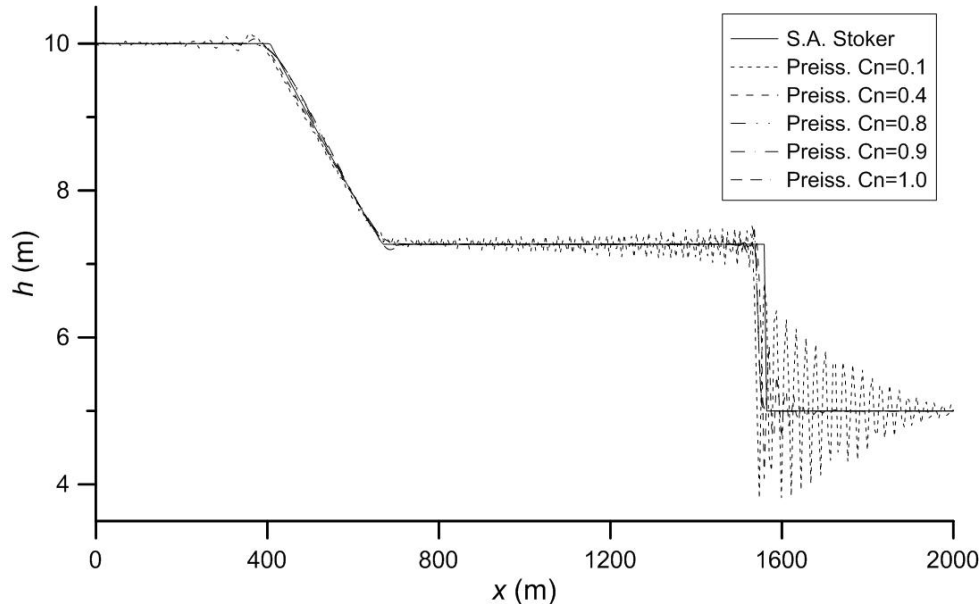
Figura 3: Efecto del factor de viscosidad artificial (k) sobre el esquema número de MacCormack



De nuevo se realiza el mismo análisis de estabilidad para el esquema de Preissmann. Con un valor fijo de la constante de Preissmann $\alpha=0.55$ se comprueba el funcionamiento del esquema numérico para diferentes valores de Cn . La figura 4 recoge los resultados gráficos de este análisis de ajuste. Valores bajos de la condición de estabilidad producen resultados

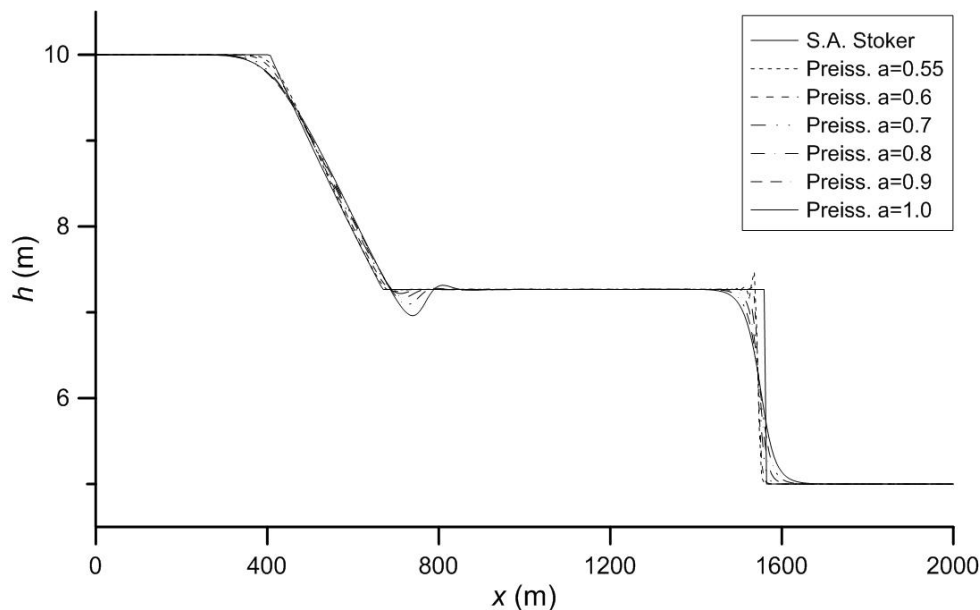
no validos del ajuste numérico, mientras que, conforme se van acercando a la unidad el RMS se reduce y se estabiliza.

Figura 4: Efecto del número de Courant (Cn) sobre el esquema número de Preissmann



De igual modo al análisis de la figura 3 sobre el esquema de MacCormack, se puede hacer con el esquema de Preissmann para la constante α . En la Figura 5 se muestran los resultados obtenidos para $C_n=0.9$ y la variación de la constante de Preissmann. Valores bajos de la constante hacen el sistema muy estable y mejoran el resultado del ajuste, mientras que valores altos hacen el sistema muy implícito y presentan oscilaciones numéricas en la solución. El mejor resultado de ajuste se obtiene para $\alpha=0.7$.

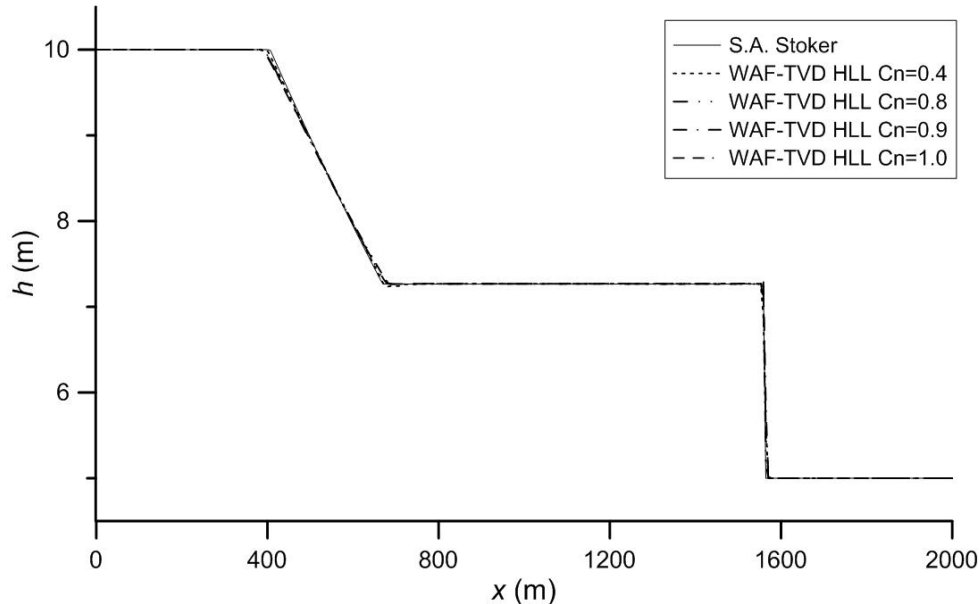
Figura 5: Efecto de la constante de Preissmann (α) sobre el esquema número de Preissmann



Para concluir el análisis de estabilidad, se estudia el efecto del número de Courant sobre el esquema numérico de volúmenes finitos considerados en este trabajo (figura 6). Debido a su segundo orden de ajuste de la solución y la idoneidad de aplicación de este tipo de métodos

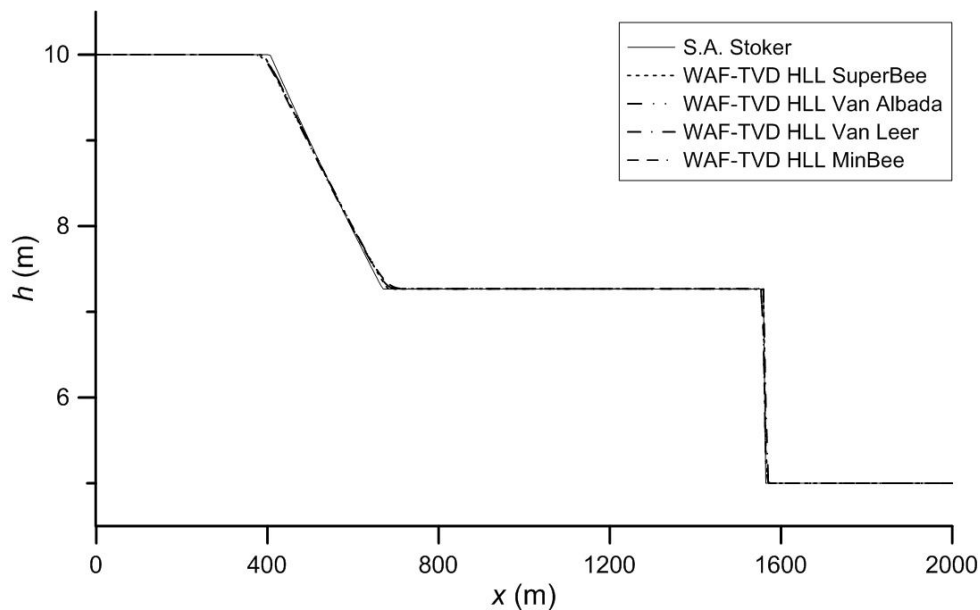
en la captura de choques, la variación del parámetro apenas influye sobre el resultado de la solución numérica.

Figura 6: Efecto del número de Courant (C_n) sobre el esquema número de TVD-WAF con HLL



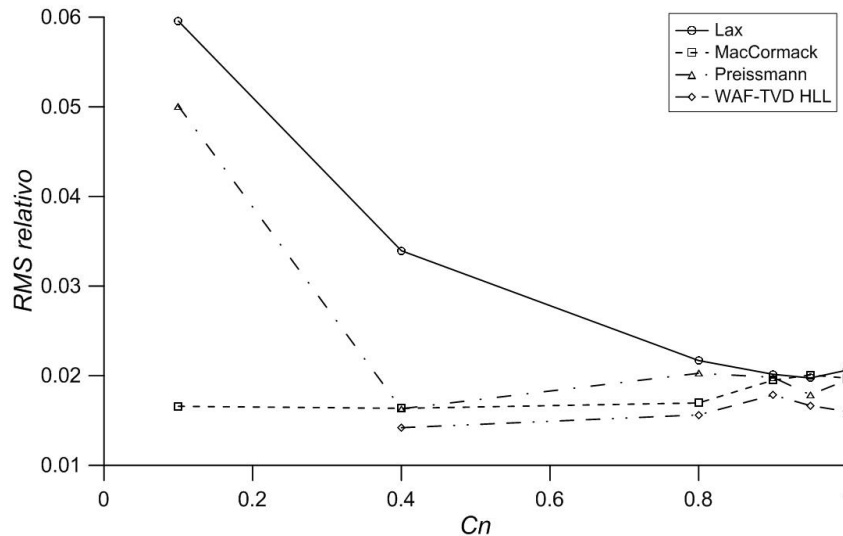
A continuación, en la figura 7, se muestra el resultado del ajuste de la solución del esquema numérico TVD-WAF con HLL utilizando los diferentes limitadores de pendiente considerados en este trabajo: SuperBee, VanAlbada, VanLeer y MinBee (Toro, 2011). Todos presentan un RMS bajo y prácticamente equiparable, donde el más bajo de todos lo arroja el limitador de Van Albada. Sin embargo, ya que el limitador de SuperBee arroja los resultados menos difusivos, este parece el más idóneo.

Figura 7: Valores RMS de ajuste para diferentes limitadores de pendiente en el esquema numérico de TVD-WAF con HLL



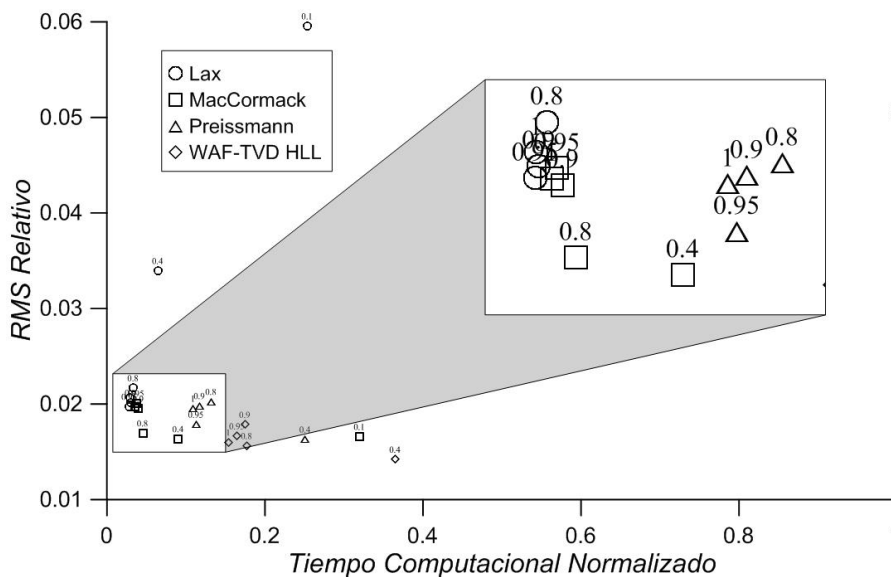
Los resultados del análisis de estabilidad del ajuste numérico se recogen en la figura 8. De ella se puede deducir que para valores cercanos a la unidad los métodos presentan un mejor comportamiento, siendo $Cn=0.9$ el valor óptimo promedio de los esquemas numéricos.

Figura 8: Valores RMS de análisis de estabilidad (Cn) de los esquemas numéricos



No solo el RMS es el único valor a tener en cuenta en un buen funcionamiento de los esquemas numéricos. El coste computacional puede llegar a ser importante cuando se pretende mejorar el modelo hidrodinámico y extender a otras dimensiones en el espacio. Por tanto, en este trabajo también se lleva a cabo un análisis del coste computacional de cada una de las alternativas analizadas anteriormente de los esquemas numéricos. Debido a la gran cantidad de información, los resultados se recogen en una gráfica de triple entrada (figura 9). Los valores del número de Courant para cada experimento se sitúan sobre el punto correspondiente al ensayo. Se observa como los valores correspondientes al TVD-WAF con HLL son mayores que la mayoría de esquemas numéricos, en cuanto a tiempo computacional empleado. MacCormack con $Cn=0.8$ se presenta como el caso óptimo entre el error RMS y el coste computacional.

Figura 9: Análisis entre el tiempo computacional y el RMS reportado por los esquemas numéricos



Sin embargo, aunque MarCormark y Lax son esquemas numéricos que presentan un buen resultado entre RMS y coste computacional, gráficamente funciona mejor el esquema TVD-WAF con HLL.

5. Conclusiones

En el presente trabajo se lleva a cabo un análisis comparativo de esquemas numéricos aplicados al caso ideal de la rotura de presa. De entre los esquemas disponibles se han considerado Lax, MarCormark, Preissmann y TVD-WAF con HLL. Para un mejor estudio del funcionamiento de los diferentes esquemas numéricos se ha medido el tiempo computacional empleado. Asimismo, se ha analizado la influencia en el resultado numérico de los parámetros: número de Courant, factor de viscosidad artificial, constante de Preissmann y limitadores de pendiente.

Los resultados indican que las salidas numéricas del esquema de Lax son altamente difusivas para todos los valores ensayados de C_n , evitando los choques de la solución. El esquema numérico de MacCormack presenta oscilaciones numéricas cerca de los cambios fuertes de pendiente. Aunque este esquema aproxima mejor los choques de la solución, ni el aumento de C_n ni del factor de viscosidad artificial consiguen eliminar las oscilaciones, aunque si mejoran el valor del RMS. Por otra parte, el esquema numérico implícito de Preissmann mejora los resultados de los anteriores métodos. Este esquema es capaz de aproximar adecuadamente los choques de la solución bajo un criterio de estabilidad y un valor del coeficiente de Preissmann óptimos. Se comprueba que ambos valores se encuentran en el entorno de $C_n=0.9$ y $\alpha=0.7$. Sin embargo, el esquema numérico de TVD-WAF con HLL, basado en la discretización del mallado mediante volúmenes finitos, es el que mejor ajusta la solución. Como indica el análisis de estabilidad del mismo, este esquema funciona correctamente para todo el rango de C_n . Además, captura los choques de la solución mucho mejor que cualquiera de los otros esquemas considerados, como indica el análisis gráfico. Por último, el análisis de los limitadores de pendiente sobre el esquema numérico de volúmenes finitos indica que todos son aceptables en cuanto al RMS; siendo Van Albada el más bajo de ellos y SuperBee el menos difusivo.

En conclusión, de entre todos los esquemas numéricos analizados para el caso ideal de la rotura de presa el esquema explícito de volúmenes finitos TVD-WAF con HLL y limitador de SuperBee es el que mejor aproxima la solución analítica.

6. Referencias

- Akan, A. O. (2011). *Open channel hydraulics*. United Kingdom, Butterworth-Heinemann.
- Anderson, D. A., Tannehill, J. C., & Pletcher, R. H. (1984). *Computational fluid dynamics and heat transfer*. MacGraw-Hill.
- Chaudhry, M. H. (2008). *Open-channel flow*. Berlin, Springer.
- Chaudhry, M. H., (1987). *Applied Hydraulic Transients*. New York, Van Nostrana Reinhold Co.
- Fennema, R. J., & Chaudhry, M. H., (1987). Simulation of One-dimensional Dam-break Flows. *Journal of Hydraulic Research*, 25, 41-51.
- Jameson, A., Schmidt, W., & Turkel, E. (1981). Numerical solutions of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 1259, 1981.
- Lax, P. D. (1954). Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 7, 159-193.
- MacCormack, R. W., (1969). The Effect of Viscosity in Hypervelocity Impact Cratering. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 69, 69-354.

- Preissmann, A., & Cunge, J. A. (1961). Calcul du mascaret sur machine électronique. *La Houille Blanche*, (5), 588-596.
- Stoker, J. J. (1957). *Water waves: The mathematical theory with applications*. Unites States, Wiley.
- Toro, E. F., (2009). *Shock-capturing methods for free-surface shallow flows*. Unites States, Wiley.
- Tseng, M. H., & Chu, C. R. (2000). The simulation of dam-break flows by an improved predictor–corrector TVD scheme. *Advances in water resources*, 23, 637-643.